

Μάιος 2017

## Τρόπος προσδιορισμού μιας ουσίας η οποία παράγεται σε διαφορετικές ποιότητες

### Εισαγωγή

Η αρωματική ουσία AH αποτελείται από πολλά ισομερή. Παράγεται σε τρεις διαφορετικές ποιότητες (ποιότητα X, Y και Z), οι οποίες διαφέρουν ως προς την αναλογία αυτών των ισομερών.

### Σύνθεση

Η ουσία, η οποία αποτελείται από πέντε ισομερή (A, B, C, D και E), παρασκευάζεται με την ακόλουθη σύνθεση:

Συστατικά	Εύρη συγκέντρωσης (%)			Συνολικό εύρος (%)
	Ποιότητα X	Ποιότητα Y	Ποιότητα Z	
<b>Ισομερές A:</b> 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
<b>Ισομερές B:</b> 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
<b>Ισομερές C:</b> [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
<b>Ισομερές D:</b> 1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
<b>Ισομερές E:</b> 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	0,5 - 1,5	4 - 6	10 - 15	0.5 - 15

Μάιος 2017

## Προσδιορισμός

### Επιλογή 1: Χωριστές καταχωρίσεις για κάθε ποιότητα

Βάσει του κανόνα 80% και 10% που περιγράφεται στην [Καθοδήγηση σχετικά με τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία ουσιών δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP](#), οι τρεις ποιότητες έχουν διαφορετικές ονομασίες, όπως παρακάτω:

- Η ποιότητα X περιέχει ένα κύριο συστατικό (ισομερές A) με συγκέντρωση  $\geq 80\%$ . Συνεπώς, ονοματοδοτείται ως μονοσυστατική ουσία:

3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one

- Η ποιότητα Y περιέχει δύο κύρια συστατικά (ισομερή A και C) με συγκέντρωση  $\geq 10\%$  και  $< 80\%$ . Συνεπώς, ονοματοδοτείται ως πολυσυστατική ουσία:

Μάζα αντίδρασης του 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one και του [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one

- Η ποιότητα Z περιέχει τρία κύρια συστατικά (ισομερή A, C και E) με συγκέντρωση  $\geq 10\%$  και  $< 80\%$ . Συνεπώς, ονοματοδοτείται ως πολυσυστατική ουσία:

Μάζα αντίδρασης του 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one και του [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one και του 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one

### Επιλογή 2: Μία καταχώριση για όλες τις ποιότητες (απαιτείται αιτιολόγηση)

Είναι δυνατός ο προσδιορισμός της ουσίας ως πολυσυστατικής ουσίας βάσει των συστατικών που είναι παρόντα σε συγκεντρώσεις  $\geq 10\%$  και στις τρεις ποιότητες (βλ. τον πίνακα για το συνολικό εύρος των τιμών συγκέντρωσης). Συνεπώς, η ουσία ονοματοδοτείται ως μάζα αντίδρασης των τεσσάρων ισομερών (ισομερές A, B, C και E), όπως παρακάτω:

Μάζα αντίδρασης του 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one και του 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one και του [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one και του 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one

Ωστόσο, απαιτείται αιτιολόγηση για αυτήν την προσέγγιση, λόγω της παρέκκλισης από τον κανόνα του 80% και τον κανόνα του 10% που περιγράφεται στην [Καθοδήγηση σχετικά με τον προσδιορισμό και την ονοματοδοσία ουσιών δυνάμει των κανονισμών REACH και CLP](#).

Η αιτιολόγηση πρέπει να περιλαμβάνει τα ακόλουθα θέματα:

- Τα διαθέσιμα δεδομένα δοκιμών καλύπτουν την αστάθεια των τριών ποιοτήτων,
- Όλες οι ποιότητες έχουν πολύ παρόμοιες φυσικοχημικές ιδιότητες,
- Όλες οι ποιότητες έχουν την ίδια ταξινόμηση και επισήμανση επικινδυνότητας και

Μάιος 2017

- Όλες οι ποιότητες χρησιμοποιούνται με παρόμοιο τρόπο και έχουν παρόμοια σενάρια έκθεσης (άρα παρόμοιες εκθέσεις χημικής ασφάλειας).